

# Document made available under the Patent Cooperation Treaty (PCT)

International application number: PCT/JP05/001223

International filing date: 28 January 2005 (28.01.2005)

Document type: Certified copy of priority document

Document details: Country/Office: JP  
Number: 2004-020493  
Filing date: 28 January 2004 (28.01.2004)

Date of receipt at the International Bureau: 24 March 2005 (24.03.2005)

Remark: Priority document submitted or transmitted to the International Bureau in compliance with Rule 17.1(a) or (b)



World Intellectual Property Organization (WIPO) - Geneva, Switzerland  
Organisation Mondiale de la Propriété Intellectuelle (OMPI) - Genève, Suisse

日 本 国 特 許 庁  
JAPAN PATENT OFFICE

02. 2. 2005

別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されている事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed with this Office.

出 願 年 月 日            2 0 0 4 年   1 月 2 8 日  
Date of Application:

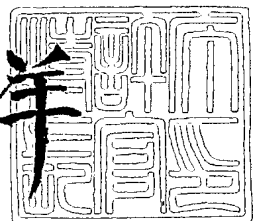
出 願 番 号            特 願 2 0 0 4 - 0 2 0 4 9 3  
Application Number:  
[ST. 10/C] :            [ J P 2 0 0 4 - 0 2 0 4 9 3 ]

出   願   人            出 光 興 産 株 式 会 社  
Applicant(s):

2 0 0 5 年   3 月   9 日

特許庁長官  
Commissioner,  
Japan Patent Office

小 川 洋



【書類名】 特許願  
【整理番号】 IDS1548A  
【提出日】 平成16年 1月28日  
【あて先】 特許庁長官 今井 康夫 殿  
【国際特許分類】 C07C 51/00  
C07C 69/00

【発明者】  
【住所又は居所】 千葉県市原市姉崎海岸 1 番地 1  
【氏名】 佐藤 治仁

【発明者】  
【住所又は居所】 千葉県市原市姉崎海岸 1 番地 1  
【氏名】 柏村 孝

【発明者】  
【住所又は居所】 千葉県市原市姉崎海岸 1 番地 1  
【氏名】 岡本 卓治

【発明者】  
【住所又は居所】 千葉県市原市姉崎海岸 1 番地 1  
【氏名】 横田 清彦

【特許出願人】  
【識別番号】 000183657  
【氏名又は名称】 出光石油化学株式会社

【代理人】  
【識別番号】 100086759  
【弁理士】  
【氏名又は名称】 渡辺 喜平

【手数料の表示】  
【予納台帳番号】 013619  
【納付金額】 21,000円

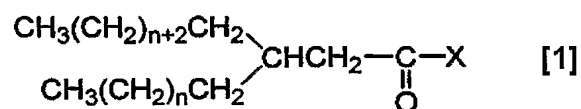
【提出物件の目録】  
【物件名】 特許請求の範囲 1  
【物件名】 明細書 1  
【物件名】 図面 1  
【物件名】 要約書 1  
【包括委任状番号】 0200132

【書類名】 特許請求の範囲

【請求項 1】

下記式 [1] に示すカルボニル化合物。

【化 1】



[式中、Xは、水素、ヒドロキシ基、アルコキシ基、又はポリオール由来の基であり、nは4～30である。]

【請求項 2】

前記式 [1] の n が 4～20 である請求項 1 に記載のカルボニル化合物。

【請求項 3】

前記式 [1] の n が 4～10 の偶数である請求項 1 に記載のカルボニル化合物。

【請求項 4】

請求項 1～3 のいずれかに記載のカルボニル化合物を含む合成潤滑油。

## 【書類名】明細書

【発明の名称】長鎖分岐アルキル基含有カルボニル化合物

## 【技術分野】

## 【0001】

本発明は、長鎖分岐アルキル基含有 1 級カルボニル化合物に関する。さらに詳しくは、低温流動性に優れ、高沸点を有し、かつ生分解性に優れた長鎖分岐アルキル基含有 1 級アルデヒド、カルボン酸及びカルボン酸エステル、及びこれらを含む合成潤滑油に関する。

## 【背景技術】

## 【0002】

エンジン油には、スラッジ等を分散させ、エンジン内を清浄に保つために、アルカリ土類金属塩を代表とする様々な潤滑油添加剤が使用されている。これらの添加剤については、その塩基性が高いほど、使用量が少なくすむため、経済的に有利である。しかし、添加剤自身の安定性が悪くなり、エンジンの表面に皮膜を形成しゲル化する等の問題がある。このため、脂肪酸の添加による改質がなされている（例えば、特許文献 1 参照。）。

また、2 サイクルエンジン油に関しては、機構上、排ガスに同伴されてエンジン油の一部が排出されることから、船外機で使用されるエンジン油等に関しては、生分解性及び熱安定性が求められている。

## 【0003】

エンジン油の添加剤として使用されるカルボン酸には、3-メチルオクタン-3-カルボン酸等の 3 級カルボン酸、2-エチルヘキサン酸、イソステアリン酸等の 2 級カルボン酸等が用いられ、長鎖分岐を有する炭素数 20 以上の 1 級カルボン酸は知られていない。これらの化合物は、潤滑油添加剤として求められる、低温流動性、低揮発性、生分解性等の性質を十分に満足するものは得られていない。

## 【0004】

また、潤滑油のベースストックには、様々なカルボン酸エステルを使用することが知られている。例えば、木材の伐採に使用されるチェーンソーの潤滑油は、鉱油系が用いられている。しかし、近年、環境問題への配慮から、生分解性を持つ植物系オイル、即ち、菜種油（脂肪酸のトリグリセリド）等を用いることが提案されている（例えば、特許文献 2 参照。）。

## 【0005】

しかし、植物系オイルは、生分解性を有しているものの、不飽和結合を持つことによる不安定性、及び乏しい低温特性等から、潤滑油用途における使用は限られている。

これに関して、熱安定性の改良を目的として合成エステルを利用することが開示されている（例えば、特許文献 3 参照。）。しかし、良好な低温特性を有するものは得られていない。

## 【0006】

生分解性を有しつつ、常温における流れ特性の改良を図ったエステル系潤滑油についても開示されている（例えば、特許文献 4 参照。）。しかし、使用されているカルボン酸は炭素数 10 までの比較的短鎖のものであり、潤滑油特性を示す重要な指数である粘度指数を十分に満足するものとはなっていない。

## 【0007】

また、ペイント塗料、エポキシ樹脂改質、化粧品原料、安定剤原料等に用いられるカルボン酸は、取り扱い上の問題から、液状で高沸点を有するカルボン酸が望まれているが、この要求を満足する化合物は知られていない。

## 【0008】

【特許文献 1】特開昭 63-203645 号公報

【特許文献 2】特開平 5-230490 号公報

【特許文献 3】特開平 5-98276 号公報

【特許文献 4】特表 2000-514470 号公報

## 【発明の開示】

## 【発明が解決しようとする課題】

## 【0009】

本発明は、上記問題に鑑み、低温流動性に優れ、高沸点を有し、かつ生分解性に優れた長鎖分岐アルキル基含有1級カルボニル化合物（アルデヒド、カルボン酸及びカルボン酸エステル）の提供を目的とする。

## 【課題を解決するための手段】

## 【0010】

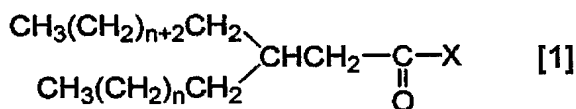
本発明者らは、上記の課題を解決するために鋭意研究を重ねた結果、鎖長の長い直鎖アルキル基を有し、ホルミル基、カルボキシ基及びエステル基のβ位に分岐を有し、かつ主鎖と分岐鎖が特定の関係を有する分岐アルキル鎖を含むアルデヒド、カルボン酸及びカルボン酸エステルが、低温流動性に優れ、高沸点を有し、かつ生分解性に優れていることを見出し、本発明を完成させた。

## 【0011】

即ち、本発明によれば、以下の長鎖分岐アルキル基含有1級カルボニル化合物及び合成潤滑油が得られる。

1. 下記式〔1〕に示すカルボニル化合物。

## 【化2】



[式中、Xは、水素、ヒドロキシ基、アルコキシ基、又はポリオール由来の基であり、nは4～30である。]

2. 前記式〔1〕のnが4～20である1に記載のカルボニル化合物。
3. 前記式〔1〕のnが4～10の偶数である1に記載のカルボニル化合物。
4. 1～3に記載のカルボニル化合物を含む合成潤滑油。

## 【発明の効果】

## 【0012】

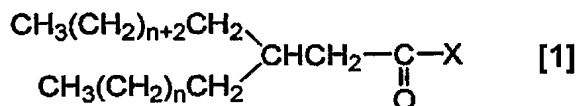
本発明によれば、低温流動性に優れ、高沸点を有し、かつ生分解性に優れた長鎖分岐アルキル基含有1級カルボニル化合物を提供できる。

## 【発明を実施するための最良の形態】

## 【0013】

以下、本発明の長鎖分岐アルキル基含有1級カルボニル化合物について説明する。  
本発明のカルボニル化合物は、下記式〔1〕に示す構造を有する。

## 【化3】



[式中、Xは、水素、ヒドロキシ基、アルコキシ基、又はポリオール由来の基であり、nは4～30である。]

## 【0014】

式〔1〕において、Xは、水素、ヒドロキシ基、アルコキシ基（OR）、又はポリオール由来の基である。即ち、Xが水素であれば、アルデヒド化合物となり、Xがヒドロキシ基であれば、カルボン酸化合物となり、Xがアルコキシ基又はポリオール由来の基であればエステル化合物となる。

## 【0015】

アルコキシ基（OR）のRは、炭素数1～100の炭化水素基であり、例えば、アルキル基、アルケニル基、アリール基又はアラルキル基を示す。

アルキル基としては、メチル基、エチル基、n-プロピル基、n-ブチル基等の直鎖ア

ルキル基、イソブチル基、イソデシル基、2-エチルヘキシル基、2-オクチルドデシル基、ネオペンチル基、t-ブチル基等の分岐アルキル基、シクロヘキシル基、シクロペンチル基、シクロプロピル基等の環状アルキル基が挙げられる。

アルケニル基としては、アリル基、ホモアリル基、ブテニル基等が挙げられる。

#### 【0016】

アリール基としては、フェニル基、トリル基、ナフチル基、ビフェニル基、ヒドロキシビフェニル基、ビナフチル基等が挙げられる。

アラルキル基としては、ベンジル基、p-トリルメチル基、p-ニトロベンジル基、p-アミノベンジル基、p-クロロベンジル基等が挙げられる。

その他のRとして、2-ブトキシエチル基、n-プロポキシエチル等の主鎖にヘテロ原子を持つものも使用できる。

これらのRのうち、好ましくは、メチル基、エチル基、n-プロピル基、n-ブチル基、イソブチル基、イソデシル基、2-エチルヘキシル基、2-オクチルドデシル基、ネオペンチル基、t-ブチル基、シクロヘキシル基、シクロペンチル基であり、特に好ましくは、メチル基、エチル基、n-プロピル基、n-ブチル基、イソブチル基、イソデシル基、2-エチルヘキシル基、2-オクチルドデシル基、t-ブチル基である。

#### 【0017】

ポリオール由来の基としては、エチレングリコール、1, 2-ブタンジオール、1, 2-ヘキサジオール、1, 4-シクロヘキサジオール、1, 5-ヘキサジオール、1, 6-ヘキサジオール、2, 5-ヘキサジオール、ジエチレングリコール、カテコール、ビフェノール、ビナフトール、ネオペンチルグリコール、フィタントリオール、トリメチロールプロパン、ジグリセリン、ペンタエリスリトール、ポリグリセリン等のポリオール類に由来するもの、コレステロール、グルコース、フルクトース、マルトース、キチン、キトサン、ソルビット、マンニット等の天然物由来アルコール類に由来するものが挙げられる。

これらのうち、好ましくは、エチレングリコール、1, 2-ブタンジオール、1, 4-ヘキサジオール、1, 5-ヘキサジオール、ジエチレングリコール、カテコール、コレステロール、グルコース、ネオペンチルグリコール、トリメチロールプロパン、ペンタエリスリトールであり、特に好ましくは、エチレングリコール、1, 5-ヘキサジオール、ジエチレングリコール、グルコース、ネオペンチルグリコール、トリメチロールプロパン、ペンタエリスリトールである。

尚、Xがポリオール由来の基である場合、ポリオールの有する1以上のヒドロキシ基がエステル結合を形成することにより、式[1]に示す構造を1以上有していればよい。

#### 【0018】

式[1]のnは、4～30の整数である。nが4未満では、沸点が低く、揮発成分が発生しやすいため、潤滑油又は潤滑油添加剤として使用する場合に問題となり、nが30を超えると、粘度が高すぎたり、また、固体となってしまう等の問題が発生する。好ましくは、nは4～20の整数であり、さらに好ましくは、4～20の偶数、なかでもnが4～10の偶数の場合が好ましい。

#### 【0019】

式[1]に示される長鎖分岐アルキル基含有1級アルデヒド化合物の具体例としては、3-ヘキシルウンデカナール、3-オクチルトリデカナール、3-デシルペンタデカナール、3-ドデシルヘプタデカナール、3-テトラデシルノナデカナール、3-ヘキサデシルイコサナール、3-オクタデシルトリコサナール、3-エイコシルペンタコサナール、3-ドコサニルヘプタコサナール等が挙げられる。

#### 【0020】

式[1]に示される長鎖分岐アルキル基含有1級カルボン酸の具体例としては、3-ヘキシルウンデカン酸、3-オクチルトリデカン酸、3-デシルペンタデカン酸、3-ドデシルヘプタデカン酸、3-テトラデシルノナデカン酸、3-ヘキサデシルイコサン酸、3-オクタデシルトリコサン酸、3-エイコシルペンタコサン酸、3-ドコサニルヘプタコ

サン酸等が挙げられる。

【0021】

式[1]に示される長鎖分岐アルキル基含有1級エステル化合物の具体例としては、3-ヘキシルウンデカン酸メチル、3-ヘキシルウンデカン酸エチル、3-ヘキシルウンデカン酸(n-プロピル)、3-ヘキシルウンデカン酸(n-ブチル)、3-ヘキシルウンデカン酸アリル、3-ヘキシルウンデカン酸ホモアリル、3-ヘキシルウンデカン酸(1-ブテニル)、3-ヘキシルウンデカン酸(2-ブテニル)、3-ヘキシルウンデカン酸(n-ブトキシエチル)、3-ヘキシルウンデカン酸(n-プロポキシエチル)、3-ヘキシルウンデカン酸イソブチル、3-ヘキシルウンデカン酸イソデシル、3-ヘキシルウンデカン酸(2-エチルヘキシル)、3-ヘキシルウンデカン酸(2-オクチルドデシル)、3-ヘキシルウンデカン酸ネオペンチル、3-ヘキシルウンデカン酸(t-ブチル)、3-ヘキシルウンデカン酸シクロヘキシル、3-ヘキシルウンデカン酸シクロペンチル、3-ヘキシルウンデカン酸シクロプロピル、3-ヘキシルウンデカン酸フェニル、3-ヘキシルウンデカン酸(p-トリル)、3-ヘキシルウンデカン酸(m-トリル)、3-ヘキシルウンデカン酸(o-トリル)、3-ヘキシルウンデカン酸(1-ナフチル)、3-ヘキシルウンデカン酸(2-ナフチル)、3-ヘキシルウンデカン酸ビフェニル、3-ヘキシルウンデカン酸ベンジル、3-ヘキシルウンデカン酸-1, 4-シクロヘキサンジオールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-カテコールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-ビフェノールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-ビナフトールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-エチレングリコールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-1, 2-ブタンジオールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-1, 5-ヘキサンジオールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-1, 6-ヘキサンジオールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-2, 5-ヘキサンジオールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-ジエチレングリコールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-ネオペンチルグリコールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-1, 4-フィタントリオールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-トリメチロールプロパンエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-ジグリセリンエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-ペンタエリスリトールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-ポリグリセリンエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-コレステロールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-グルコースエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-フルクトースエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-マルトースエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-キチンエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-キトサンエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-ソルビットエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸-マンニットエステル類、

【0022】

3-オクチルトリデカン酸メチル、3-オクチルトリデカン酸エチル、3-オクチルトリデカン酸(n-プロピル)、3-オクチルトリデカン酸(n-ブチル)、3-オクチルトリデカン酸アリル、3-オクチルトリデカン酸ホモアリル、3-オクチルトリデカン酸(1-ブテニル)、3-オクチルトリデカン酸(2-ブテニル)、3-オクチルトリデカン酸(n-ブトキシエチル)、3-オクチルトリデカン酸(n-プロポキシエチル)、3-オクチルトリデカン酸イソブチル、3-オクチルトリデカン酸イソデシル、3-オクチルトリデカン酸(2-エチルヘキシル)、3-オクチルトリデカン酸(2-オクチルドデシル)、3-オクチルトリデカン酸ネオペンチル、3-オクチルトリデカン酸(t-ブチル)、3-オクチルトリデカン酸シクロヘキシル、3-オクチルトリデカン酸シクロペンチル、3-オクチルトリデカン酸シクロプロピル、3-オクチルトリデカン酸フェニル、3-オクチルトリデカン酸(p-トリル)、3-オクチルトリデカン酸(m-トリル)、3-オクチルトリデカン酸(o-トリル)、3-オクチルトリデカン酸(1-ナフチル)、3-オクチルトリデカン酸(2-ナフチル)、3-オクチルトリデカン酸ビフェニル、3-オクチルトリデカン酸ベンジル、3-オクチルトリデカン酸-1, 4-シクロヘキサンジオールエステル類、3-オクチルトリデカン酸-カテコールエステル類、3-オクチルトリデカン酸-ビフェノールエステル類、3-オクチルトリデカン酸-ビナフトールエ



ステル類、3-オクチルトリデカン酸-エチレングリコールエステル類、3-オクチルトリデカン酸-1, 2-ブタンジオールエステル類、3-オクチルトリデカン酸-1, 5-ヘキサジオールエステル類、3-オクチルトリデカン酸-1, 6-ヘキサジオールエステル類、3-オクチルトリデカン酸-2, 5-ヘキサジオールエステル類、3-オクチルトリデカン酸-ジエチレングリコールエステル類、3-オクチルトリデカン酸-ネオペンチルグリコールエステル類、3-オクチルトリデカン酸-1, 4-フィタントリオールエステル類、3-オクチルトリデカン酸-トリメチロールプロパンエステル類、3-オクチルトリデカン酸-ジグリセリンエステル類、3-オクチルトリデカン酸-ペンタエリスリトールエステル類、3-オクチルトリデカン酸-ポリグリセリンエステル類、3-オクチルトリデカン酸-コレステロールエステル類、3-オクチルトリデカン酸-グルコースエステル類、3-オクチルトリデカン酸-フルクトースエステル類、3-オクチルトリデカン酸-マルトースエステル類、3-オクチルトリデカン酸-キチンエステル類、3-オクチルトリデカン酸-キトサンエステル類、3-オクチルトリデカン酸-ソルビットエステル類、3-オクチルトリデカン酸-マンニットエステル類、

**【0023】**

3-デシルペンタデカン酸メチル、3-デシルペンタデカン酸エチル、3-デシルペンタデカン酸(n-プロピル)、3-デシルペンタデカン酸(n-ブチル)、3-デシルペンタデカン酸アリル、3-デシルペンタデカン酸ホモアリル、3-デシルペンタデカン酸(1-ブテニル)、3-デシルペンタデカン酸(2-ブテニル)、3-デシルペンタデカン酸(n-ブトキシエチル)、3-デシルペンタデカン酸(n-プロポキシエチル)、3-デシルペンタデカン酸イソブチル、3-デシルペンタデカン酸イソデシル、3-デシルペンタデカン酸(2-エチルヘキシル)、3-デシルペンタデカン酸(2-オクチルドデシル)、3-デシルペンタデカン酸ネオペンチル、3-デシルペンタデカン酸(t-ブチル)、3-デシルペンタデカン酸シクロヘキシル、3-デシルペンタデカン酸シクロペンチル、3-デシルペンタデカン酸シクロプロピル、3-デシルペンタデカン酸フェニル、3-デシルペンタデカン酸(p-トリル)、3-デシルペンタデカン酸(m-トリル)、3-デシルペンタデカン酸(o-トリル)、3-デシルペンタデカン酸(1-ナフチル)、3-デシルペンタデカン酸(2-ナフチル)、3-デシルペンタデカン酸ビフェニル、3-デシルペンタデカン酸ベンジル、3-デシルペンタデカン酸-1, 4-シクロヘキサジオールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-カテコールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-ビフェノールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-ビナフトールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-エチレングリコールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-1, 2-ブタンジオールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-1, 5-ヘキサジオールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-1, 6-ヘキサジオールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-2, 5-ヘキサジオールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-ジエチレングリコールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-ネオペンチルグリコールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-1, 4-フィタントリオールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-トリメチロールプロパンエステル類、3-デシルペンタデカン酸-ジグリセリンエステル類、3-デシルペンタデカン酸-ペンタエリスリトールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-ポリグリセリンエステル類、3-デシルペンタデカン酸-コレステロールエステル類、3-デシルペンタデカン酸-グルコースエステル類、3-デシルペンタデカン酸-フルクトースエステル類、3-デシルペンタデカン酸-マルトースエステル類、3-デシルペンタデカン酸-キチンエステル類、3-デシルペンタデカン酸-キトサンエステル類、3-デシルペンタデカン酸-ソルビットエステル類、3-デシルペンタデカン酸-マンニットエステル類、

**【0024】**

3-ドデシルヘプタデカン酸メチル、3-ドデシルヘプタデカン酸エチル、3-ドデシルヘプタデカン酸(n-プロピル)、3-ドデシルヘプタデカン酸(n-ブチル)、3-ドデシルヘプタデカン酸アリル、3-ドデシルヘプタデカン酸ホモアリル、3-ドデシルヘプタデカン酸(1-ブテニル)、3-ドデシルヘプタデカン酸(2-ブテニル)、3-

ドデシルヘプタデカン酸 (n-ブトキシエチル)、3-ドデシルヘプタデカン酸 (n-プロポキシエチル)、3-ドデシルヘプタデカン酸イソブチル、3-ドデシルヘプタデカン酸イソデシル、3-ドデシルヘプタデカン酸 (2-エチルヘキシル)、3-ドデシルヘプタデカン酸 (2-オクチルドデシル)、3-ドデシルヘプタデカン酸ネオペンチル、3-ドデシルヘプタデカン酸 (t-ブチル)、3-ドデシルヘプタデカン酸シクロヘキシル、3-ドデシルヘプタデカン酸シクロペンチル、3-ドデシルヘプタデカン酸シクロプロピル、3-ドデシルヘプタデカン酸フェニル、3-ドデシルヘプタデカン酸 (p-トリル)、3-ドデシルヘプタデカン酸 (m-トリル)、3-ドデシルヘプタデカン酸 (o-トリル)、3-ドデシルヘプタデカン酸 (1-ナフチル)、3-ドデシルヘプタデカン酸 (2-ナフチル)、3-ドデシルヘプタデカン酸ビフェニル、3-ドデシルヘプタデカン酸ベンジル、3-ドデシルヘプタデカン酸-1, 4-シクロヘキサンジオールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-カテコールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-ビフェノールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-ビナフトールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-エチレングリコールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-1, 2-ブタンジオールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-1, 5-ヘキサンジオールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-1, 6-ヘキサンジオールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-2, 5-ヘキサンジオールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-ジエチレングリコールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-ネオペンチルグリコールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-1, 4-フィタントリオールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-トリメチロールプロパンエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-ジグリセリンエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-ペンタエリスリトールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-ポリグリセリンエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-コレステロールエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-グルコースエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-フルクトースエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-マルトースエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-キチンエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-キトサンエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-ソルビットエステル類、3-ドデシルヘプタデカン酸-マンニットエステル類等が挙げられる。

#### 【0025】

尚、ここでは長鎖分岐アルキル基含有1級エステル化合物の例として、式[1]中、nが4, 6, 8, 10の例を記載したが、これらに限られず、上述した範囲においてnを適宜選択できる。

#### 【0026】

次に、式[1]に示すカルボニル化合物の合成方法について説明する。

図1は、本発明のカルボニル化合物の合成スキームの一例を示す図である。

出発化合物としては、図1中、式[2]で示されるビニリデン化合物を使用する。ビニリデン化合物は、特定の長さの $\alpha$ -オレフィン、メタロセン触媒等を用いて2量化することで合成できる。

このビニリデン化合物を常法によりカルボニル化することで、アルデヒド化合物(図1中、式[3])、カルボン酸化合物(図1中、式[4])が得られる。

#### 【0027】

尚、式[4]のカルボン酸化合物を合成する他の方法としては、 $\alpha$ -オレフィンの2量化ビニリデン化合物に、Vilsmeier反応を経由する方法、又は対応するハロゲン化合物よりグリニヤール試薬、リチウム試薬等の求核性化合物を調製し、これに二酸化炭素、炭酸ジメチル、ジメチルホルムアミド等を反応させた後に、目的のカルボン酸を得る方法等が挙げられる。

#### 【0028】

エステル化合物[図1中、式[6]]を得る方法としては、対応するハロゲン化合物[図1中、式[5]]より調製したグリニヤール試薬、リチウム試薬等の求核試薬に、炭酸ジメチル等の炭酸エステル類を反応させる方法や、上記の方法で得たカルボン酸[図1中、

式〔4〕〕とアルコール類を、酸又は塩基触媒の存在化、加熱脱水する方法、さらに、カルボン酸を塩化チオニル等の試薬を用いて、酸塩化物に誘導し、その後、アルコールと反応させる方法等が挙げられる。

#### 【0029】

本発明のカルボニル化合物は、低温流動性に優れ、高沸点を有し、かつ生分解性に優れている。そのため、合成潤滑油の添加剤として好適に使用できる。

本発明の合成潤滑油は、上述した式〔1〕に示すカルボニル化合物を含んでいる。これらカルボニル化合物のなかでも、3-オクチルトリデカン酸メチル、3-オクチルトリデカン酸、3-オクチルトリデカナール、3-オクチルトリデカン酸イソブチル、3-オクチルトリデカン酸（2-エチルヘキシル）、3-オクチルトリデカン酸-（1, 5-ヘキササンジオールエステル類）、3-オクチルトリデカン酸-ネオペンチルグリコールエステル類、3-オクチルトリデカン酸（トリメチロールプロパンエステル類）、3-オクチルトリデカン酸-（ペンタエリスリトールエステル類）、3-ヘキシルウンデカン酸メチル、3-ヘキシルウンデカン酸、3-ヘキシルウンデカナール、3-ヘキシルウンデカン酸イソブチル、3-ヘキシルウンデカン酸（2-エチルヘキシル）、3-ヘキシルウンデカン酸（1, 5-ヘキササンジオールエステル類）、3-ヘキシルウンデカン酸-ネオペンチルグリコールエステル類、3-ヘキシルウンデカン酸（トリメチロールプロパンエステル類）、3-デシルペンタデカン酸メチル、3-デシルペンタデカン酸、3-デシルペンタデカナール、3-デシルペンタデカン酸イソブチルが好ましく、特に、3-オクチルトリデカン酸メチル、3-オクチルトリデカン酸、3-オクチルトリデカナール、3-オクチルトリデカン酸イソブチル、3-オクチルトリデカン酸（2-エチルヘキシル）、3-オクチルトリデカン酸-（1, 5-ヘキササンジオールエステル類）、3-オクチルトリデカン酸-（ネオペンチルグリコールエステル類）、3-オクチルトリデカン酸（トリメチロールプロパンエステル類）、3-オクチルトリデカン酸-（ペンタエリスリトールエステル類）が好ましい。

#### 【0030】

合成潤滑油に含まれるその他の成分としては、潤滑油において一般に使用されるベース油、清浄分散剤、粘度調整剤を挙げることができる。

#### 【0031】

本発明の合成潤滑油は、低温流動性に優れ、高沸点を有し、かつ生分解性に優れている長鎖分岐アルキル基含有1級カルボニル化合物を使用しているので、優れた潤滑性能を有し、しかも、環境負荷が少ない。従って、エンジン、チェーンソー、軸受け油、切削油等に使用される潤滑油として好適に使用できる。

#### 【実施例】

##### 【0032】

以下、実施例に基づいて本発明を具体的に説明するが、本発明はこれらの実施例に限定されるものではない。

尚、化合物の同定及び評価は、下記の方法にて行なった。

##### (1) NMR

日本電子（株）製、JNM-LA500を用いて測定を行なった。

##### (2) GC-MS

キャリアガスにヘリウムを用い、カラムはDB-1HTを用い、100～330℃（10℃/分）昇温で昇温を行なった。検出方法はEI及びCI法を用いた。

##### (3) 生分解性評価

JIS K6950に準じ、タイテック社製BODテスターを用いて、試料濃度100ppm、活性汚泥濃度30ppm、25℃の条件下で28日間測定した。

##### 【0033】

#### 実施例1

本発明のエステル化合物として、3-オクチルトリデカン酸メチルエステルを合成した。

## [合成方法]

2-オクチルドデカノール 10 g (33.49 mmol, アルドリッチ社製) とトリフェニルホスフィン 8.8 g (33.5 mmol, 関東化学社製) を脱水ジクロロメタン 100 ml に溶解し氷冷した。これに、N-ブロモコハク酸イミド 6.0 g (33.9 mmol, 和光純薬社製) を徐々に加えた後、室温で 3 時間攪拌した。減圧下、溶媒を留去し、残渣にヘキサンを加え沈殿を濾別し、ろ液を濃縮することにより 2-オクチル-1-ブロモドデカン 10.0 g (27.6 mmol) を得た。

## 【0034】

窒素気流下、マグネシウム 3 g (123.3 mmol) を脱水テトラヒドロフラン溶液 30 ml に懸濁させ、ジブロモエタンでマグネシウムを活性化させた。これに、合成した 2-オクチル-1-ブロモドデカン 8.0 g (22.1 mmol) の脱水テトラヒドロフラン溶液 120 ml を滴下した。滴下終了後、さらに 2 時間攪拌した。反応混合物を氷冷し、炭酸ジメチル 2.0 ml (23.7 mmol) を加えた後、室温 (25℃) で一晩攪拌を行なった。反応溶液を濾過後、濾液に希塩酸を加え、ヘキサンを用いて抽出を行なった後、減圧下、溶媒を留去した。残渣を、0.15 mmHg、オイルバス温度 180~190℃ の条件で蒸留することにより、3-オクチルトリデカン酸メチルエステル 5.0 g (14.7 mmol) を無色オイルとして得た。この化合物は -20℃ に冷却しても流動性を失うことが無かった。

合成した 3-オクチルトリデカン酸メチルエステルの、 $^1\text{H-NMR}$ 、 $^{13}\text{C-NMR}$  及び GC-MS の測定結果を以下に示す。

## 【0035】

$[^1\text{H-NMR} (\text{CDCl}_3)]$

0.88 (t,  $J=14\text{ Hz}$ , 6H,  $\text{CH}_3$ ), 1.26 ( $\text{CH}_2$ , 32H), 1.84 (m, 1H, CH), 2.23 (d,  $J=14\text{ Hz}$ , 2H,  $\text{CH}_2\text{CO}$ ), 3.65 (s, 3H,  $\text{OCH}_3$ )

$[^{13}\text{C-NMR} (\text{CDCl}_3)]$

14.00 ( $\text{CH}_3$ ): 22.58 ( $\underline{\text{CH}_2}-\text{CH}_3$ ): 26.41, 29.20, 29.24, 29.47, 29.51, 29.78, 31.81, 33.79 (以上、 $\text{CH}_2$ ): 34.95 (CH): 38.99 ( $\underline{\text{CH}_2}\text{C}=\text{O}$ ): 51.21 ( $\text{OCH}_3$ ): 74.03 ( $\text{C}=\text{O}$ )

[GC-MS]

341 ( $\text{M}^+ + 1$ ), 227 ( $\text{M}^+ - (\text{C}_8\text{H}_{17}) + 1$ ), 199 ( $\text{M}^+ - (\text{C}_{10}\text{H}_{21}) + 1$ )

## 【0036】

## 実施例 2

本発明のカルボン酸化合物として、3-オクチルトリデカン酸を合成した。

## [合成方法]

窒素気流下、3-オクチルトリデカン酸メチルエステル 5.0 g (14.7 mmol) に水酸化カリウム 1.7 g (43.5 mmol) の水溶液 30 ml を加え、80℃ で 5 時間加熱した。反応溶液を希塩酸で酸性にした後、エーテル抽出することにより 3-オクチルトリデカン酸 4.2 g (13.1 mmol) を無色オイルとして得た。

この化合物は -20℃ に冷却しても流動性を失うことが無く、低温流動性に優れていた。

合成した 3-オクチルトリデカン酸の、 $^1\text{H-NMR}$ 、 $^{13}\text{C-NMR}$  及び GC-MS の測定結果を以下に示す。

## 【0037】

$[^1\text{H-NMR} (\text{CDCl}_3)]$

0.88 (t,  $J=14.0\text{ Hz}$ , 6H,  $\text{CH}_3$ ), 1.26 (32H,  $\text{CH}_2$ ), 1.84 (m, 1H, CH), 2.26 (d,  $J=13.0\text{ Hz}$ , 2H,  $\text{CH}_2\text{CO}$ )

$[^{13}\text{C-NMR} (\text{CDCl}_3)]$

14.00 ( $\text{CH}_3$ ) : 22.59 ( $\text{CH}_2 - \text{CH}_3$ ) : 26.39, 29.21, 29.26, 29.48, 29.54, 29.78, 31.80, 33.67 (以上、 $\text{CH}_2$ ) : 34.77 ( $\text{CH}$ ) : 38.94 ( $\text{CH}_2\text{CO}$ ) : 179.53 ( $\text{C}=\text{O}$ )

[GC-MS]

326 ( $\text{M}^+$ ), 213 ( $\text{M}^+ - (\text{C}_8\text{H}_{17})$ ), 141 ( $\text{M}^+ - (\text{C}_{10}\text{H}_{21})$ )

【0038】

### 実施例 3

本発明のアルデヒド化合物として、3-オクチルトリデカナルを合成した。

[合成方法]

窒素気流下、マグネシウム 3 g (123.3 mmol) を脱水テトラヒドロフラン溶液 30 ml に懸濁させ、ジブロモエタンでマグネシウムを活性化させた。

実施例 1 の方法で得た、2-オクチル-1-ブロモドデカン 8.0 g (22.1 mmol) の脱水テトラヒドロフラン溶液 120 ml を滴下し、滴下終了後、更に 2 時間撹拌した。反応混合物を氷冷し、脱水ジメチルホルムアミド 5.0 ml (66.3 mmol、関東化学社製) を加えた後、室温 (25℃) にて一晩撹拌を行なった。溶液に希塩酸を加え、ヘキサンを用いて抽出を行ない、減圧下溶媒を留去した。残渣を真空蒸留することにより、3-オクチルトリデカナルを無色オイルとして得た。

この化合物は、-20℃に冷却しても流動性を失うことはなかった。

合成した 3-オクチルトリデカナルの、 $^1\text{H}$ -NMR、 $^{13}\text{C}$ -NMR 及び GC-MS の測定結果を以下に示す。

【0039】

[ $^1\text{H}$ -NMR ( $\text{CDCl}_3$ )]

0.88 (t,  $J=14\text{ Hz}$ , 6H,  $\text{CH}_3$ ), 1.26 ( $\text{CH}_2$ , 32H), 1.95 (m, 1H,  $\text{CH}$ ), 2.32 (dd,  $J=6.7, 2.4\text{ Hz}$ , 2H,  $\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{H}$ ), 9.75 (t,  $J=2.4\text{ Hz}$ , 1H,  $\text{C}(\text{O})\text{H}$ )

[ $^{13}\text{C}$ -NMR ( $\text{CDCl}_3$ )]

14.00 ( $\text{CH}_3$ ) : 22.55 ( $\text{CH}_2 - \text{CH}_3$ ) : 26.56, 29.18, 29.23, 29.44, 29.49, 29.74, 31.77, 34.08 (以上、 $\text{CH}_2$ ) : 32.91 ( $\text{CH}$ ) : 48.51 ( $\text{CH}_2 - \text{C}(\text{O})\text{H}$ ), 203.17 ( $\text{C}=\text{O}$ )

[GC-MS]

311 ( $\text{M}^+ + 1$ )

【0040】

実施例 1 又は 2 で合成した 3-オクチルトリデカン酸、3-オクチルトリデカン酸メチルエステル、及び、比較例として、2-エチルヘキサン酸メチルエステル (2-エチルヘキサン酸 (和光純薬社製) とメタノールより、常法により合成したもの) について生分解性試験を実施した。結果を表 1 に示す。

【0041】

【表 1】

化合物名	生分解度 (%)
3-オクチルトリデカン酸	62.7
3-オクチルトリデカン酸メチル エステル	52.3
2-エチルヘキサン酸メチルエステル	25.7

【0042】

表 1 に示した結果から、本発明の長鎖分岐アルキル基含有 1 級カルボニル化合物が高い生分解性を有していることが確認できた。また、比較例であるエステル化合物は、生分解性が低く、生分解性を必要とする分野では使用できないことが確認できた。

【産業上の利用可能性】

【0 0 4 3】

本発明の長鎖分岐アルキル基含有 1 級カルボニル化合物は、低温流動性に優れ、高沸点を有し、かつ生分解性に優れている。従って、潤滑油、潤滑油添加剤、ペイント塗料、樹脂改質、化粧品原料等に好適に使用できる。

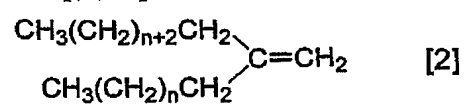
【図面の簡単な説明】

【0 0 4 4】

【図 1】 本発明の長鎖分岐アルキル基含有 1 級カルボニル化合物の合成スキームの一例を示す図である。

【書類名】 図面

【図 1】



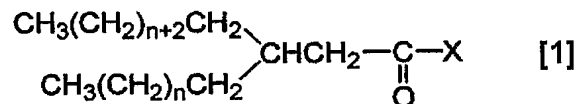
【書類名】 要約書

【要約】

【課題】 低温流動性に優れ、高沸点を有し、かつ生分解性に優れた長鎖分岐アルキル基含有 1 級カルボニル化合物及び合成潤滑油を提供する。

【解決手段】 下記式 [1] に示すカルボニル化合物。

【化 1】



〔式中、X は、水素、ヒドロキシ基、アルコキシ基、又はポリオール由来の基であり、n は 4 ～ 3 0 である。〕。この化合物は、低温流動性に優れ、高沸点を有し、かつ生分解性に優れており、合成潤滑油に好適に使用できる。

【選択図】 なし



【書類名】 出願人名義変更届 (一般承継)  
【提出日】 平成16年 9月13日  
【あて先】 特許庁長官 小川 洋 殿  
【事件の表示】  
    【出願番号】 特願2004- 20493  
【承継人】  
    【識別番号】 000183646  
    【氏名又は名称】 出光興産株式会社  
【承継人代理人】  
    【識別番号】 100086759  
    【弁理士】  
    【氏名又は名称】 渡辺 喜平  
【提出物件の目録】  
    【物件名】 承継人であることを証する書面 1  
    【援用の表示】 特願 2 0 0 4 - 1 9 9 6 7 5 の出願人名義変更届に添付のものを  
                    援用する。  
    【包括委任状番号】 0200131

特願 2 0 0 4 - 0 2 0 4 9 3

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号 [ 0 0 0 1 8 3 6 5 7 ]

1. 変更年月日	2 0 0 0 年 6 月 3 0 日
[変更理由]	住所変更
住 所	東京都墨田区横網一丁目 6 番 1 号
氏 名	出光石油化学株式会社

特願 2 0 0 4 - 0 2 0 4 9 3

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号 [ 0 0 0 1 8 3 6 4 6 ]

1. 変更年月日 1 9 9 0 年 8 月 8 日

[変更理由] 新規登録

住 所 東京都千代田区丸の内 3 丁目 1 番 1 号

氏 名 出光興産株式会社